WWW.SCIAM-MAGAZINE.NAROD.RU

«Перемешивающая машина» — клеточный автомат, моделирующий химические реакции

А. К. ДЬЮДНИ

Клеточные автоматы — компьютерные модели, основанные на массивах клеток, волной распространились в физике, математике и других науках. Теперь появилась новая разновидность клеточного автомата, которая сама в буквальном смысле порождает волны. Названная ее изобретателями «перемешивающей машиной» (hodgepodge machine), она моделирует химические реакции с такой точностью, которая редко достигается в других моделях.

Реакции, моделируемые этой машиной, происходят в активной химической среде, где два вещества (или больше) могут диссоциировать или рекомбинировать в присутствии катализатора. Если реагирующие вещества имеют различный цвет, то в таких средах можно наблюдать волнообразные структуры, которые, распространяясь постоянно, изменяют фронт с простым или сложным очертанием.

Может ли сам по себе автомат послужить адекватным физическим объяснением волнового процесса, действительно наблюдаемого в ходе реакции? Этот вопрос занимает сейчас изобретателей «перемешивающей машины» М. Герхардта и Х. Шустер из Билефельдского университета в ФРГ, а также многих других исследователей из различных университетских центров.

Клеточный автомат можно представить в виде бесконечной решетки квадратных клеток, состояние которых меняется со временем в такт дискретным сигналам воображаемого часового механизма. На каждом временно́м такте каждая клетка находится в одном из конечного множества состояний. Состояние клетки на такте $t + 1$ достаточно несложным образом зависит от состояния клеток в ее непосредственной окрестности на предыдущем такте t. Эта зависимость выражается в виде набора правил, одинаково применимых ко всем клеткам решетки. При последовательном применении правил на каждом такте часового механизма произвольная исходная конфигурация состояний клеток может изменяться и, таким образом, эволюционировать во времени. Иногда в процессе таких последовательных изменений можно наблюдать, как создаются чрезвычайно интересные структуры.В результате возникает убеждение, что при правильной исходной конфигурации клеточный автомат может породить нечто самоорганизующееся, способное к росту и воспроизводству — короче, нечто «живое».

Возможно, самым известным для наших читателей примером клеточных автоматов является знаменитая игра «жизнь», изобретенная в 60-х годах математиком Дж. Конвеем из Кембриджского университета. В игре «жизнь» каждая клетка может находиться лишь в одном из двух возможных состояний: живом или мертвом. Правила игры очень просты. Если клетка мертва на момент времени t, то она оживает в момент $t + 1$, если трое ее соседей были живы на момент времени t. Если же клетка жива на момент времени t, то она умирает в момент $t + 1$, если меньше двух или больше трех ее соседей были живы на момент времени t. Этих двух правил оказывается достаточно для того, чтобы клеточный автомат «жизнь» демонстрировал удивительно многообразное поведение, целиком и полностью зависящее от исходной конфигурации живых и мертвых клеток (см. статьи в рубрике «Занимательный компьютер» в журналах «В мире науки»: 1985 г., № 7 и 1987 г., № 4).

Перемешивающая машина представляет собой целое семейство клеточных автоматов. Конкретную версию можно выбрать, указав значения ряда параметров, таких, например, как количество возможных состояний. Если количество состояний равно $n + 1$, то каждое возможное состояние клетки можно представить числом в диапазоне от 0 до n. Герхардт и Шустер расширили метафору Конвея при описании состояний их машины. Клетка в состоянии 0 считается «здоровой», а в состоянии n — «больной». Все промежуточные состояния соответствуют той или иной степени «зараженности», в зависимости от номера состояния — чем ближе номер состояния клетки к числу n, тем в большей степени она «заражена». Перемешивающая машина избирательно применяет одно из трех правил к каждой клетке, в зависимости от того, здорова она, заражена или больна.

Если клетка здорова (другими словами, находится в состоянии 0), то на следующем такте она перейдет в новое состояние, зависящее от числа зараженных клеток A и числа больных клеток B среди ее непосредственных соседей, а также от двух параметров, которые мы обозначим $k1$ и $k2$. Точнее, состояние клетки на момент времени $t + 1$ определяется следующей формулой:

$$[A / k1] + [B / k2].$$

Здесь квадратные скобки обозначают операцию округления того дробного числа, которое в них заключено. Если, например, $A / k1$ окажется равным 2,725, то квадратные скобки сведут это число к 2. Если формула даст нулевое значение, то клетка, конечно, останется здоровой — по крайней мере пока.

Если клетка заражена, ее состояние со временем обычно ухудшается. Состояние зараженной клетки на момент времени $t + 1$ вычисляется как сумма двух чисел: степени заражения клеток в окрестности на момент t и постоянной величины g, регулирующей скорость распространения инфекции среди клеток. Первая величина — степень заражения клеток в окрестности — получается делением числа S, суммы состояний самой клетки и ее соседей, на A — число зараженных соседей. Таким образом, клетка, зараженная на момент времени t, принимает в момент $t + 1$ состояние, вычисляемое по следующей формуле:

$$[S / A] + g.$$

Однако зараженная клетка не может стать «больнее» n. Если значение, полученное по формуле, превысит n, то в качестве номера следующего состояния клетки принимается n.

Наконец, если на момент времени t клетка больна (находится в состоянии n), то она чудесным образом выздоравливает (принимает состояние 0) в момент $t + 1$.

В дополнение к этим трем правилам необходимо четко определить, что мы понимаем под «окрестностью» клетки. Исторически в клеточных автоматах применялись два типа окрестностей: окрестность фон Неймана и окрестность Мура. Окрестность фон Неймана для каждой клетки состоит из четырех соседних кле-

WWW.SCIAM-MAGAZINE.NAROD.RU

ток, имеющих по одной общей стороне с данной клеткой. Окрестность Мура, помимо клеток из окрестности фон Неймана, включает также четыре клетки, соприкасающиеся с данной в ее вершинах — т. е. всего 8 клеток. При заданных трех правилах и определенном типе окрестности клетки клеточный автомат Герхардта—Шустер можно полностью определить, указав значения четырех параметров: n — числа возможных состояний минус 1; $k1$ и $k2$ — «весовых» параметров для здоровых клеток и g — скорости распространения инфекции.

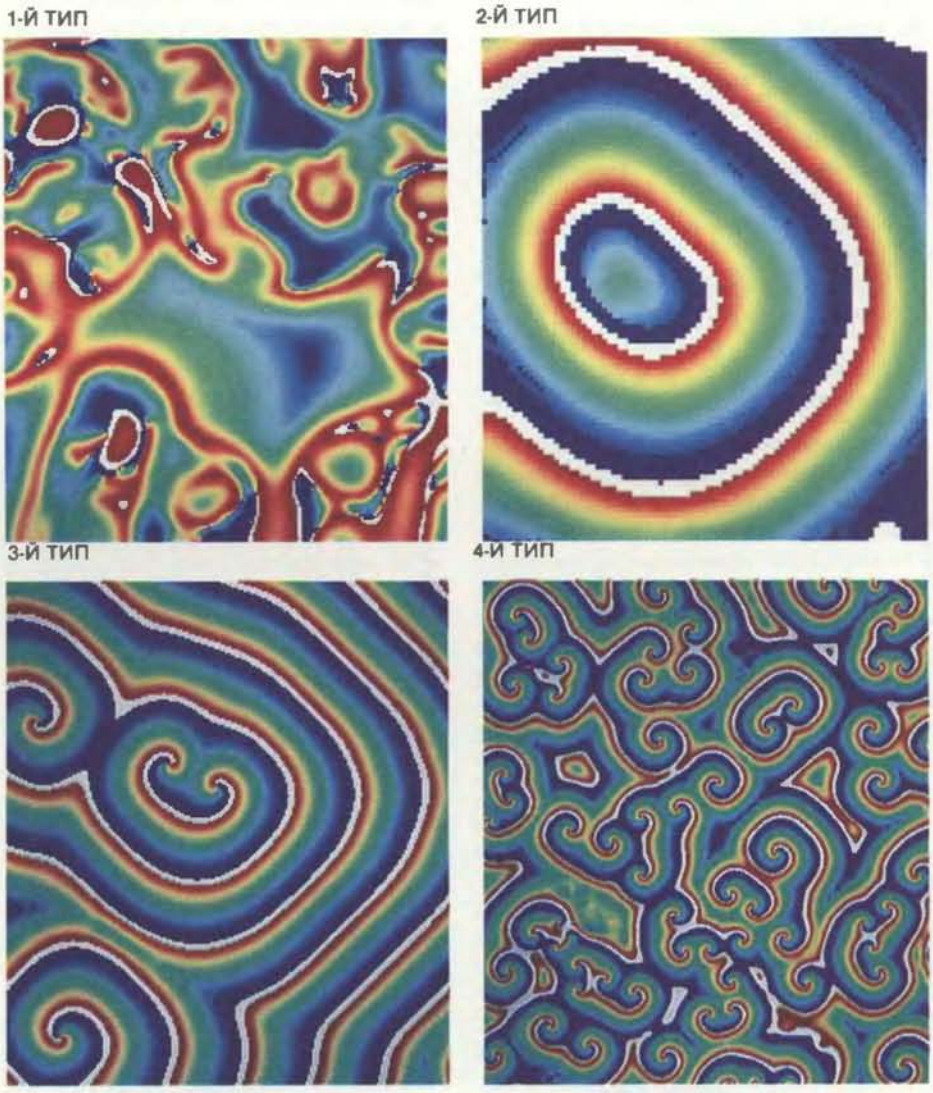
В эксперименте, проведенном Герхардтом и Шустер на решетке размером 20 × 20 с использованием окрестности фон Неймана, проявилось типичное для перемешивающих машин поведение. (Клетки на краях решетки подчиняются тем же правилам, которые действуют повсюду в клеточном автомате, с той лишь разницей, что у граничных клеток меньше соседей в окрестности.) Значения параметров n, $k1$ и $k2$ были выбраны равными соответственно 100, 2 и 3. При различных значениях параметра g наблюдалось четыре вида поведения. Обычно при каждом прогоне модели Герхардт и Шустер придавали 400 клеткам решетки 20 × 20 случайную исходную конфигурацию состояний, устанавливали значение g и запускали перемешивающую машину на 10 000 вычислительных циклов. Поскольку данные, организованные в одномерные структуры, легче анализировать, чем двумерные изображения, Герхардт и Шустер записывали на каждом цикле лишь число зараженных клеток, с тем чтобы результаты можно было представить в виде графиков, аналогичных тем, что приведены на с. 84.

В малых значениях параметра g машина не демонстрирует ничего интересного. За исключением нескольких начальных флуктуаций, активные процессы в клетках имеют тенденцию к затуханию, клетки становятся здоровыми и навсегда остаются в этом состоянии. Однако с ростом g автомат начинает вести себя необычно. Среди множества возможных состояний в этом случае можно выделить несколько типичных. Начнем с того, что большинство клеток становятся зараженными и, как правило, они остаются в зараженном состоянии, хотя время от времени возникают случайные во времени и пространстве конфигурации здоровых клеток. Такое поведение автомата Герхардта и Шустер условно назвали поведением типа 1.

Следующий тип поведения, который они наблюдали, был обозначен как тип 2. Он характеризуется обычно регулярными последовательностями зараженного состояния, образующими «плато» длительностью примерно 30 циклов, которые неожиданно сменяются появлением большого количества здоровых клеток. (Иногда почти все 400 клеток внезапно выздоравливают, но затем сразу же начинается новая волна инфекции.) По мере дальнейшего роста значений параметра g начинает проявляться поведение третьего типа. Оно характеризуется возникновением весьма регулярного чередования между насыщением и фактическим исчезновением зараженных клеток приблизительно через каждые 20 циклов. И наконец, для четвертого типа поведения характерно то, что после первых нескольких циклов количество зараженных клеток начинает колебаться с некоторой регулярностью около насыщающего значения, равного примерно 75%.

Хотя эти четыре типа поведения наблюдались при последовательном росте значений g, иногда области значений g частично перекрывались, т. е. при пограничных значениях g автомат иногда демонстрировал поведение одного типа, а иногда — другого. В нескольких случаях Герхардт и Шустер наблюдали даже переходы между двумя различными типами поведения в ходе одного и того же прогона программы.

Для каждого из описанных четырех типов поведения характерны свои волновые структуры, изображенные на цветной иллюстрации внизу; размеры решетки варьировались от 20 × 20 до 500 × 500. Волны, наблюдающиеся при поведении первого типа, распространяются лишь на короткое расстояние и быстро затухают. Волны второго типа распространяются по направлению к границам в виде круглых полос со значительными вариациями по ширине. Волны третьего типа также имеют круговую форму, но отличаются большей регулярностью, в соответствии с регулярными максимумами и минимумами числа зараженных клеток. Наконец, волны четвертого типа имеют спиральную форму и распространяются из центра



Перемешивающая машина генерирует волны

WWW.SCIAM-MAGAZINE.NAROD.RU

решетки к ее границам. Как всегда, читателям, имеющим собственные компьютеры, предлагается в той или иной форме повторить эти эксперименты. Волнам на экране наверняка будут сопутствовать волны мысли.

Некоторые типы волн, генерируемые перемешивающей машиной, аналогичны волнам, наблюдаемым в определенных химических системах, в частности, машина порождает волны, являющиеся точной копией волн, которые возникают в ходе известной реакции Белоусова—Жаботинского. Сравним, например, сложные узоры завихрений на компьютерном изображении и на фотографии реакции Белоусова—Жаботинского, приведенных на с. 85.

В чем причина такого сходства? Оно едва ли удивило Герхардта и Шустер, ведь они изобрели перемешивающую машину специально для того, чтобы промоделировать свойства определенного типа «неоднородной каталитической реакции», в ходе которой монооксид углерода окисляется и адсорбируется крошечными палладиевыми кристаллитами, рассеянными в пористой среде. По мере того как продукт реакции, диоксид углерода, покрывает поверхность кристаллитов, тепло, выделяемое при реакции, изменяет состояние катализатора. При внезапном фазовом переходе в кристаллите двуокись углерода выделяется в виде газа, затем катализатор охлаждается и реакция начинается снова.

Перемешивающая машина хорошо промоделировала не только эту реакцию, но и реакцию Белоусова—Жаботинского, в ходе которой малоновая кислота окисляется бромматом калия в присутствии катализатора, такого как церий или железо. Клетки решетки представляют по существу частицы катализатора, а метафора «зараженного» состояния отражает явление постепенного насыщения поверхностей этих частиц.

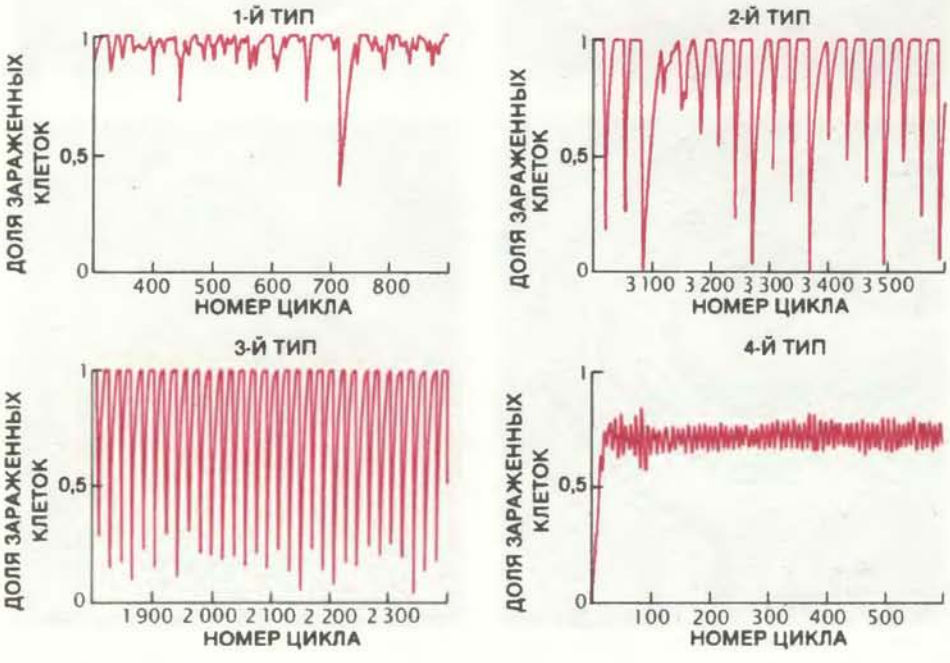
Однако аналогия здесь не так проста, есть тут и свои тонкости. Во-первых, в перемешивающей машине соседние клетки взаимодействуют между собой, так сказать, обмениваясь инфекцией. А каким образом частицы катализатора обмениваются активностью? Герхардт и Шустер считают, что, по крайней мере в случае реакции окисления оксида углерода, частицы катализатора оказывают воздействие на своих соседей посредством двух основных механизмов. Частица катализатора может стать более активной, получив некоторое количество тепла от соседней частицы, которая активнее данной, или в результате диффузии молекул оксида углерода от соседней частицы, которая менее активна.

Благодаря взаимодействию между соседними клетками перемешивающей машины у них появляется возможность синхронизировать свою активность. После некоторого начального периода случайной дезорганизации (фазы «перемешивания») в поведении машины начинает проявляться синхронность. То же самое, как можно предположить, справедливо и в отношении реальных химических реакций. Объясняет ли, таким образом, перемешивающая машина появление волн в ходе реакции, которую она моделирует?

Найдутся, конечно, такие, кто сразу воскликнет: «Разумеется!» и в качестве свидетельства укажет на изображения. Ну что же, есть люди, которые видят клеточные автоматы повсюду. В апрельском номере журнала «The Atlantic» была помещена статья, посвященная космологическим рассуждениям Э. Фредкина. Этот бизнесмен в области вычислительной техники, а в прошлом ученый, предполагает, что вся наша Вселенная состоит из клеток, которые переключаются из одного состояния в другое подобно гигантскому клеточному автомату. Откровенно говоря, свидетельств в пользу справедливости такого предположения не так уж много. Результаты, демонстрируемые перемешивающей машиной, конечно, впечатляют, но не убеждают. А что по этому поводу думают сами изобретатели машины? Несмотря на тот факт, что перемешивающая машина так хорошо моделирует реакцию Белоусова—Жаботинского, Герхардт и Шустер не утверждают, что все химические реакции имеют клеточную природу. Они рассматривают свой автомат лишь как инструмент, позволяющий получить некое приближение к реальности, как дискретную версию дифференциального уравнения в частных производных.

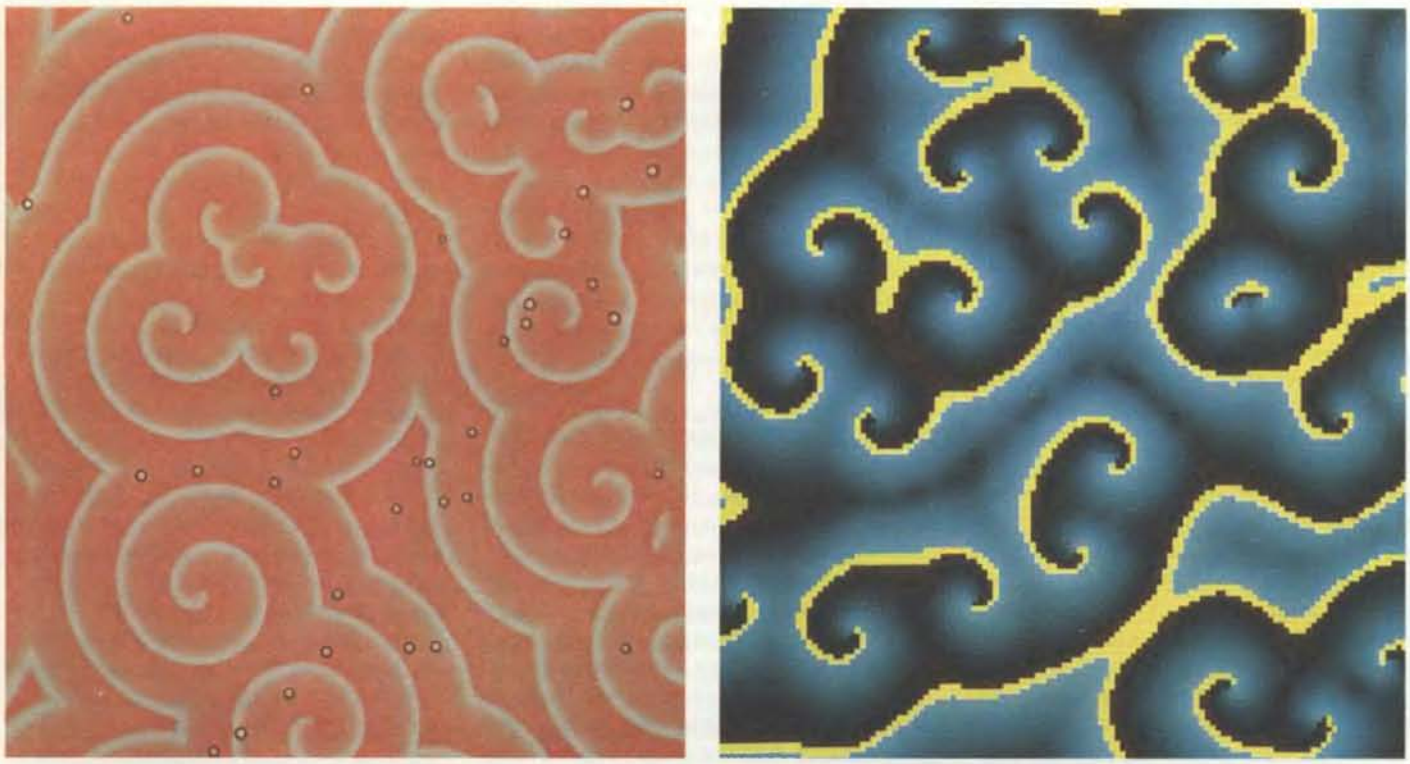
Вдохновленные первоначально работой химиков Н. Йегера и П. Плата из Бременского университета, Герхардт и Шустер вместе со своим учителем в Билефельдском университете А. Дрессом начали работать над перемешивающей машиной, пригласив на помощь двух химиков: С. Мюллера из Института физиологии питания Макса Планка в Дортмунде и Дж. Тайсона из Политехнического института и Университета шт. Виргиния. Создатели машины хотят показать, что массив «химических осцилляторов», взаимодействующих между собой согласно некоторым простым правилам, будет неизбежно генерировать волны. Предположительно существует лишь небольшое число возможных волновых структур, хотя, по мнению Тайсона, при переходе к трем измерениям они становятся значительно более сложными. В связи с тем что трехмерные волновые фронты значительно труднее наблюдать в лабораторных условиях, компьютерные модели могут помочь химикам в их поисках. Вообще следует заметить, что ученый должен хорошо уметь пользоваться моделями, при этом модель должна служить ученому, а не ученый модели.

Читатели, которые пожелают построить свои собственные версии перемешивающей машины, уже, наверное, получили достаточно сведений для того, чтобы приступить к работе. Нужно объявить массив подходящего



Четыре типа поведения перемешивающей машины

WWW.SCIAM-MAGAZINE.NAROD.RU



Волновые явления в химической реакции Белоусова—Жаботинского (слева) и их аналог в перемешивающей машине (справа).

размера и организовать большой цикл, в котором элементы этого массива изменяются в соответствии с тремя правилами, и полученные значения выводятся для обозрения. Каждый элемент массива должен содержать номер состояния соответствующей клетки. Однако при вычислении нового массива необходимо временно где-то запомнить результаты, скажем в другом массиве, до тех пор пока вычисления не будут завершены. Затем в простом двойном цикле можно полностью заменить элементы старого массива элементами нового.

Вычисление нового массива также производится в двойном цикле. Две индексные переменные, скажем *i* и *j*, служат указателями на клетки решетки. Для каждой клетки, заданной координатами (*i*, *j*), программа (которую мы, конечно, назовем HODGEPODGE) выполняет два условных оператора *if*, выясняя таким образом, здорова или больна эта клетка. Если она здорова, производятся вычисления по первой формуле, а если заражена, применяется вторая формула. В любом из этих случаев придется еще определить состояние клеток, лежащих в непосредственной окрестности данной. Если же клетка и не здорова, и не заражена, то она, очевидно, «больна» и на следующем такте должна «выздороветь».

Ввиду того что размеры нашей статьи не должны выходить за определенные пределы, мы ограничимся этим кратким рецептом.

НЕМНОГИХ людей ввело в заблуждение путешествие на остров Апрафал, описание которого приводилось в июньском номере журнала. Тем же, кого статья увлекла, пришлось изрядно повозиться над восстановлением аналоговой перемножающей машины островитян—устройства, перемножающего два числа исключительно посредством веревок и блоков. Некоторые настолько глубоко прониклись духом этого исследования, что объявили себя специалистами по древней культуре островитян. Рекордсменом оказался К. Грант из Чичестера (шт. Нью-Гемпшир). В длинном письме Грант рассказывает о переписке с таинственным доктором Гребдлогом Эбуром, известным ученым, изучающим древнюю историю острова Апрафал. Вот что он, в частности, пишет: «Прочтя статью о развитии математики у древних апрафалитян, я связался с доктором Гребдлогом и спросил, не встречался ли он случайно в своих исследованиях... с апрафалитянским аналоговым перемножителем... Он ответил, что действительно занимался исследованием этого вопроса, и выслал мне копию своей статьи». И далее: «Статья была написана от руки, каллиграфическим почерком Гребдлога. Она сопровождалась техническими схемами устройств, состоящих из блоков, кулачков и перемычек. Гребдлог отмечает, что эти схемы свидетельствуют о незаурядной изобретательности и трудолюбии островитян, проявленных ими при создании этого устройства, но, пожалуй, еще больше удивляет его почти полная практическая бесполезность этого устройства».

В письмах читателей чаще всего предлагалась конструкция перемножителя с использованием стержня, один конец которого крепится к фиксированному шарниру. Веревка, играющая роль входного сигнала и привязанная к стержню на некотором расстоянии от конца, оттягивает его вперед, так что веревка, представляющая выходной сигнал и привязанная к свободному концу, также оттягивается в том же направлении. Поскольку стержень по существу представляет собой рычаг с осью в шарнире, выходная веревка перемещается на большее расстояние, чем входная. Основной недостаток этой конструкции заключается в потере пропорциональности этих перемещений, по мере того как входная линия вытягивается на большее расстояние, конец стрежня описывает дугу окружности, и эффект усиления на выходном конце постепенно сводится на нет. В различных вариантах описанной конструкции проблема, связанная с круговым движением стержня, решается либо при помощи специальных направляющих, либо при помощи сложных систем параллельно соединенных стержней. Такой подход представляется мне слишком замысловатым. Возможно, в условии задачи следовало оговорить, что использовать стержни запрещается.

WWW.SCIAM-MAGAZINE.NARODRU

Р. Нортон из Мадисона (шт. Висконсин) применил спиральные блоки, позволяющие вычислять логарифмы и антилогарифмы. Входные линии *A* и *B* разматываются с двух барабанов (которые не запрещены, потому что представляют собой просто широкие блоки). Каждый из этих барабанов крепится к спиральному барабану, на который наматывается выходная линия. Два выходных сигнала складываются затем способом, описанным в конце статьи о веревочном компьютере. Антилогарифм суммы вычисляется посредством наматывания дополнительной веревки на спиральный барабан, соединенный с простым барабаном, на который наматывается веревка, представляющая окончательный выходной сигнал. Аналогичная машина была «открыта» Р. Эддиусом из Нью-Йорка. Он утверждает, что островитяне пользовались раковинами моллюсков, спиральная форма которых позволяла вычислять логарифмы с высокой точностью! Д.Фокс из Лимы (шт. Огайо) сообщает, что племена сходной культуры населяли когда-то один из маленьких островков, расположенный неподалеку от группы Маршалловых островов. Здесь он обнаружил не только аналогичные устройства для вычисления логарифмов и антилогарифмов, но и приспособление для возведения чисел в квадрат, которое напоминает йоу-йоу, распространенную на Филиппинах игрушку — диск с канавками для шнурка, поднимающийся и опускающийся подобно чертику на веревочке. Возможно, читатели захотят поразмыслить о справедливости утверждения Фокса?

К. Фостер из Восточного Орлеана (шт. Массачусетс) считает, что цивилизация апрафалитян погибла из-за проблемы нагрузочной способности, возникающей, когда выходной единичный сигнал вентилей компьютера не в точности равен единице. Чтобы исключить всякую неточность в священных вычислениях, верховные жрецы приставили к каждому логическому вентилю по одному островитянину, который должен был тянуть за выходную веревку, если она недостаточно натянута. Занятому этой работой населению не хватало времени на производство продуктов питания, и в конце концов люди вымерли с голоду.

И наконец, последнее слово принадлежит специалисту по архитектуре современных компьютеров М. Пейгану из Маунт-Лорела (шт. Нью-Джерси). Обеспокоенный образовавшимся у островитян разрывом между культурой аналоговых и культурой цифровых устройств, Пейган придумал восхитительный аналого-цифровой преобразователь. Одна веревка, представляющая аналоговый сигнал, входит в устройство и некоторое число веревок, представляющих цифровой эквивалент входного числа, выходит из него. Такая машина могла быть изобретена и на Апрафале, но жрецы наверняка запретили бы подобную ересь (слово pagan, созвучное фамилии Пейган, означает «языческий». — *Перев.*)

Наука и общество

Соперничество в области производства графических суперкомпьютеров

В ПРИЕМНОЙ фирмы Ardent Computer в Саннивейле (шт. Калифорния) висит гигантская разрисованная футболка. На ней изображен «мир суперкомпьютеров»: фирма Ardent, конечно, на переднем плане и ей отведена бóльшая часть. Любопытно, что на заднем плане, над вершиной горы Фудзи, возвышается японская компания по производству тяжелого технического оборудования Kubota. Примечательно также, что художники фирмы Ardent забыли о своем главном конкуренте — компании Stellar computer, штаб-квартира которой находится в Ньютоне (шт. Массачусетс). Как шутливо заметил один из руководителей компании Stellar, Дж. У. Подаска-старший, это его не волнует, в конце концов, «мы делаем компьютеры, а не футболки».

Тем не менее этот рисунок свидетельствует о том, что расстановка сил в мире производителей компьютеров для научно-технических расчетов в какой-то степени меняется. Как Ardent, так и Stellar разрабатывают компьютеры, в которых применяется то, что представители Национального научного фонда называют визуализацией, — сочетание высокопроизводительных вычислений и трехмерной графики.

На протяжении последнего десятилетия, когда в области научно-технических расчетных задач возрастала доминирующая роль суперкомпьютеров, специалисты, занимающиеся решением этих задач, все чаще сталкивались с ситуацией, когда получаемые с помощью быстродействующих машин результаты сами по себе выглядят ничуть не проще исходных задач. Уже более пяти лет назад появились оснащенные графическими терминалами рабочие места, с помощью которых исследователи могут получать более осмысленное представление своих результатов. Вычислительные возможности этих рабочих мест были ограниченны, и сотни исследователей, зачастую конкурирующих, пытались получить время для решения своих задач на суперкомпьютере, с тем чтобы потом вывести результаты на графические терминалы. Если алгоритм расчетной модели, а следовательно, и результаты оказывались неправильными, исследователь должен был начинать все сначала. Ardent Stellar, а вскоре и ряд других фирм-изготовителей, включая Silicon Graphics и Apollo Computer, поставили перед собой задачу заполнить разрыв между высокопроизводительными машинами, выполняющими вычислительную работу, и относительно медленными средствами построения трехмерных изображений так называемыми графическими суперкомпьютерами.

Обладая быстродействием приблизительно вдвое меньшим по сравнению с первыми суперкомпьютерами типа «Cray», новые машины демонстрируют изящные трехмерные изображения всего, чего угодно, от структуры молекул до картины воздушных потоков, обтекающих крыло самолета. При этом они дают возможность пользователю изменять сложные алгоритмы по ходу выполнения расчетов и наблюдать, каким образом эти изменения влияют на вычислительный процесс и результаты. Возможность наблюдать за промежуточными этапами расчетов «откроет перспективы, о которых никто до сих пор не мог и думать», — предсказывает Дж. Томас, старший научный сотрудник из лаборатории Battelle Pacific Northwest в Ричленде (шт. Вашингтон). К тому же, добавил Томас, цена компьютеров фирмы Ardent или Stellar от 100 до 200 тыс. долл., в зависимости от предоставляемых возможностей, выглядит вполне приемлемой.

Администраторы А. Мичелс из фирмы Ardent и Подаска из Stellar уверены, что спрос на средства визуализации достаточно высок для того, чтобы их компании могли рассчитывать на хорошие прибыли. Подаска говорит, что в этом году доходы его фирмы от продажи графических суперкомпьютеров должны составить более 18 млн. долл. По словам Мичелса, фирма Ardent уже располагает заказами примерно на 40 машин. По прогнозам обеих фирм к 1990 г. объем продаж их машин превысит 500 млн. долл.

Пока наибольший интерес к средствам визуализации проявили специали-